LIAISON CHIMIQUE

* LCAO-MO :

$\Phi = a_1 S_A + a_2 S_B$ $\Phi = a_1 \Psi_A + a_2 \Psi_B$

$1S_A = \Psi_A = K e^{-\frac{r_A}{a_0}}$ $1S_B = \Psi_B = K e^{-\frac{r_B}{a_0}}$

$\sigma_S^{l} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1S_A + 1S_B)$ $\sigma_S^{*} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1S_A - 1S_B)$

$\sigma_Z^{l} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2P_{ZA} - 2P_{ZB})$

* Indice de Liaison :

$\sigma_Z^{*} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2P_{ZA} + 2P_{ZB})$

$i = \frac{1}{2}(n - n^*)$

* Longeur de Liaison :

Si $i(x) > i(y)$ → $l(x) < l(y)$

* la stabilité :

Si $i(x) > i(y)$ → $\Delta H_{diss}(x) > \Delta H_{diss}(y)$

x plus stable que y.

* plan nodal :

C'est un plan dans lequel la densité électronique est nulle $[(\sigma)^2 = 0]$

FSR SMPC

* Diagramme énergitique :

Si $Z \leq 7$ D.E avec interaction.

Si $Z > 7$ D.E sans interaction.

Si $\chi(A) > \chi(B)$

$\Rightarrow E_{OA}{}^{2s}(A) < E_{OA}{}^{2s}(B)$ → $E_{OA}{}^{2p}(A) < E_{OA}{}^{2p}(B)$

exosup.com page facebook

*** Sens de moment dipolaire :**

$\chi(A) > \chi(B)$

$B^{(+q)} — A^{(-q)}$; $\overleftarrow{\mu_{BA}}$

*** charge porté par l'atome :**

$$\delta = \frac{\mu_{(BA)}}{4{,}8 \cdot l}$$

FSR SMPC

*** pourcentage d'un caractère ion :**

$$r = \frac{\mu_{exp}}{\mu_{ionique}} \times 100$$

$$\mu_{ionique} = 4{,}8 \times l$$

* Molécule formée par 2 atomes de même χ : liaison covalente normale

* " " " " de χ ≠ : liaison covalente polaire

* " " " " un donneur é et l'autre accepteur d'e⁻ : liaison ionique

* un ion peut existé sous ~~1~~ (plusieurs) forme mésomères à cause de la délocalisation des e⁻ (π).

*** Type d'interaction :**

Interaction dipôle instantanée - dipôle instantané.

Effet de dispersion de London.

⟹ molécule apolaire { gaz rare. ; $\sum \mu = 0$

Interaction dipole permanent - dipôle permanent

Effet Keesom.

⟹ molecule polaire

exosup.com page facebook

Interaction dipôle permanent - dipôle induit

Effet de Debye

⟹ molécule polaire.

⟹ molécule apolaire.

FSR SMPC

* Energie réticulaire :

$$MX_{(s)} \xrightarrow{\Delta H^{\circ}_{Rét}} M^{+}_{(g)} + X^{-}_{(g)}$$

$$\Delta H^{\circ}_{Rét} = E_R > 0$$

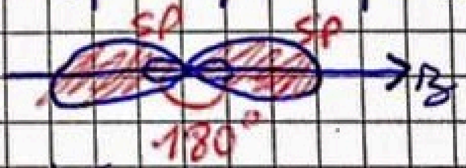
* Théorie d'hybridation :

il est introduit pour expliquer la géométrie des molécules polyatomiques respecter les valeur expérimentales des angles de liaison.

il y a 3 types (états) d'hybridation sp - sp² - sp³ :

sp :

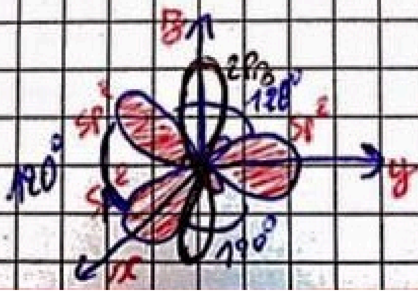
sp sp | 2 O.A.H — $2p_x$ $2p_y$ | 2 O.A pure



il présente { $\frac{1}{2}$ caractère (s) ; $\frac{1}{2}$ " (p)

sp² :

sp² sp² sp² | 3 OAH — $2p_z$ | 1 OA pure



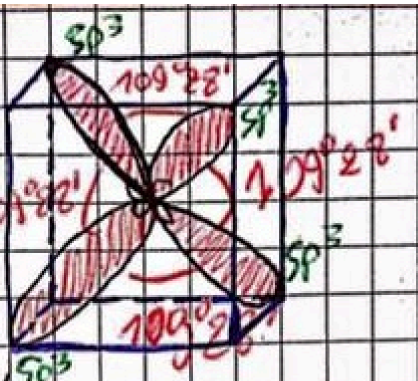
{ $\frac{1}{3}$ du caractère (s). ; $\frac{2}{3}$ du caractère (p).

exosup.com page facebook

sp^3 :

sp^3 sp^3 sp^3 sp^3

4 O.A.H



4/4

$\begin{cases} \frac{1}{4} \text{ du caractère (S)} \\ \frac{3}{4} \text{ du caractère (P)} \end{cases}$

n : nombre de doublet libre. — V : nombre d'atome voisins.

Si $\begin{cases} n + V = 2 \Rightarrow \text{l'atome de hybride } sp \\ n + V = 3 \Rightarrow \quad " \quad " \quad sp^2 \\ n + V = 4 \Rightarrow \quad " \quad " \quad sp^3 \end{cases}$

* Théorie de Gillespie :

il permet de prévoir la géométrie de la molécule dans l'espace.

la molécule est symbolisée par :

AX_mE_n

A : atome central — X_m : atome liant — E_n : doublet libre

FSR SMPC

Type de molécule AX_mE_n	Nombre de doublet liants (m)	Nombre de doublet libre (n)	nombre total de doublets (n + m)	forme de base	géométrie de la molécule
AX_2	2	0	2	Droite	Linéaire
AX_3	3	0	3	Triangle	Triangle
AX_2E	2	1	3	équilatéral	forme en V
AX_4	4	0	4	Tétraèdre	Tétraèdre
AX_3E	3	1	4	Tétraèdre	Pyramide
AX_2E_2	2	2	4	Tétraèdre	forme en V

exosup.com page facebook